BEITRÄGE ZUR THEORIE DER FESTKÖRPERELEKTRONEN IM ÄUSSEREN HOMOGENEN MAGNETFELD

Asterios Jannussis

1963

BEITRÄGE ZUR THEORIE DER FESTKÖRPERELEKTRONEN IM ÄUSSEREN HOMOGENEN MAGNETFELD

Inaugural - Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

vorgelegt
von
Asterios Jannussis
aus
Avdella-Kozani
Griechenland

Frankfurt am Main 1962

Gedruckt mit Genehmigung der
Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main.

Dekan : Prof . Dr . Th. Wieland

1. Gutachter (Referent): Prof. Dr. B. Mrowka
2. Gutachter (Korreferent): Prof. Dr. G. Süßmann

Tag der mündlichen Prüfung: 22. Februar 1963

Tag der Promotion: 27. Februar 1963

R. UNIV. BIBLIOTHEEK LEIDEN

Meinen Eltern
in Dankbarkeit
gewidmet

Ich bin Herrn Professor Mrowka, der mir stets mit Rat und Unterstützung zur Seite stand, zu großem Dank verpflichtet.

Herrn Professor Süßmann danke ich auch für sein Interesse an dieser Arbeit.

Inhaltsverzeichnis

		Seite
Problemstellung		1 - 3
I.	Allgemeine Eigenschaften der Eigenfunktionen	4 - 12
	1. Die Harper sche Periodizitäts-Symmetriebedingung	4
	2. Freie Elektronen im Magnetfeld und die geeignete Eigenfunktion (Schrauben-Funktion)	7
	3. Anschauliche Darstellung für freie Elektronen im Magnetfeld	10
II.	Gitterelektronen im Magnetfeld	12 - 21
	1. Die geeignete Eigenfunktion	12
	2. Zweidimensionales periodisches Potential	14
	3. Cosinusförmiges dreidimensionales Potential	16
	4. Störungsrechnung und die Bloch sche Summe mit Schrauben - Funktion	19
III.	Eigenwerte	22 - 23
	1. Aussagen über die Eigenwerte der Energie	22
	2. Diskussion der Energieformel	22
	3. Zusammenfassende Darstellung der Gitterelektronen im Magnetfeld	23
IV.	Anwendungen auf Diamagnetismus	24 - 32
	1. Abzählung der Zustände; Normierung der Eigenfunktion	24
	2. Berechnung der Zustandssumme Z	27
	3. Berechnung der freien Energie F	31
	4. Diamagnetismus	32
Zusammenfassung		34
Anhang 1		36

Problemstellung

Für viele physikalische Eigenschaften der Metalle und Halbleiter in einem äußeren homogenen Magnetfeld geben uns die Experimente Informationen über die Energie-Niveaus der Elektronen in einem Magnetfeld. Beispiele dafür sind die diamagnetische Suszeptibilität, De Haas-Van Alphen Effekt, Zyklotronresonanz und magnetooptische Effekte.

Die theoretischen Auffassungen dieses Problems sind von vielen Physikern studiert worden, aber leider ist bis heute das Problem unvollständig gelöst[1].

Die ersten Arbeiten darüber stammen von Landau[2] (1930) für freie Elektronen im Magnetfeld und von Peierls[3] (1933) über Leitungselektronen.

Peierls hat dafür eine Methode ausgearbeitet, um ohne Kenntnis der Eigenwerte die diamagnetische Suszeptibilität berechnen zu können. Außerdem hat er folgendes Theorem abgeleitet:

Die Energie läßt sich näherungsweise als Eigenwert eines äquivalenten Hamilton Operators berechnen, der aus der Kristallenergie E ($\vec{k}$) eines Bandes durch die Substitution

$$\vec{k} \rightarrow \text{grad} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \qquad (1)$$

hergestellt wird. $A(\vec{r})$ bedeutet hier das Vektorpotential. Dieses Theorem wurde auch von vielen anderen Autoren[4 - 10] mit ungeeigneten Näherungen abgeleitet.

---

1. W. Kohn, Proc. Phys. Soc. (London), 72, 1147 (1960) Phys. Rev. 115, 1460 (1960)
2. L. Landau, Z. Phys. 64, 629 (1930)
3. R. Peierls, Z. Phys. 80, 763 (1933)
4. J. Luttinger, Phys. Rev. 84, 814 (1951)
5. E. Adams II, Phys. Rev. 85, 45 (1952), 89, 633 (1953)
6. J. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1955)
7. P. Harper, Proc. Phys. Soc. (London) A, 68, 874, 879 (1955)
8. I. Lifschitz, A. Kosevich, Dokl. Akad. Nauk. USSR, 96, 963 (1954) JETP, 29, 730, (1955), Soviet Phys. JETP 2, 636 (1955)
9. I. Lifschitz, M. Kaganov, Usp. Fiz. Nauk. 69, 419 (1959) Soviet Phys. Uspekhi 2, 831 (1960)
10. G. Zilberman, JETP 32, 296 (1957) 33, 387 (1957) Soviet Phys. JETP 5, 208 (1957), 6, 299 (1958)

Die Anwendbarkeit dieses Theorems für Gitterelektronen ist begrenzt, wie von Hund[11] angegeben wird.

Eine frühere Untersuchung[12] ergab, daß dieses Theorem nicht geeignet ist, die Eigenwerte der Energie in stationären Zuständen zu bestimmen. Harper[7] hat in seiner Arbeit eine wichtige Eigenschaft der Eigenfunktion im Magnetfeld und im Gitterpotential abgeleitet, die Periodizitäts-Symmetriebedingung.

Dieselbe geht für verschwindendes Magnetfeld ($H \rightarrow O$) in die Bloch sche Translations-Bedingung[13] über.

Weiter hat Harper gezeigt, daß die Energie im Magnetfeld und im Gitterpotential eine periodische Funktion eines reellen Vektors $\vec{k}$ ist, wobei die Periode proportional zum Vektorpotential $\vec{A}(\vec{a}_j)$ ist. Dabei bedeuten $\vec{a}_j$ die Basisvektoren des Gitters.

$$E\left(\vec{k} - \frac{e}{\hbar c}\vec{A}(\vec{a}_j)\right) = E(\vec{k}) \qquad (2)$$

Das meistens angewandte Verfahren einer Störungsrechnung nach Potenzen des Magnetfeldes ist aus folgenden Gründen wenig geeignet:

a) Wenn sich das Elektron nicht gerade in der Nähe des Koordinatenursprungs aufhält, ist der vom Magnetfeld abhängige Anteil in der Schrödinger-Gleichung keineswegs klein (gegen den vom Magnetfeld unabhängigen Anteil) und kann daher nicht als Störung behandelt werden.

b) Da der vom Magnetfeld abhängige Anteil in der Schrödinger-Gleichung auch von den Ableitungen $\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}$ abhängt und diese an verschiedenen Stellen dem Betrage nach sehr groß werden können, ist man nicht mehr berechtigt, das Problem störungsmäßig zu behandeln.

---

11. F. Hund, Theorie des Aufbaues der Materie § 73 (B. Teubner Verlagsges. Stuttgart 1961)
12. A. Jannussis, Diplom-Arbeit (1958) Frankfurt/M., Institut für th. Physik
13. F. Bloch, Z. Physik 52, 555 (1928)

Da die üblichen Näherungen für das Problem nicht ausreichend sind, wird in der vorliegenden Arbeit eine geeignete Lösung der Schrödinger-Gleichung aufgestellt. Dabei wird für die freien Elektronen im Magnetfeld eine andere Form für die Eigenfunktion der Schrödinger-Gleichung benutzt. Diese Eigenfunktion (1. 16) hat bequemere Eigenschaften als die Landausche und die Dingle sche [14], nämlich:

a. Sie geht stetig über in die Eigenfunktion des freien Elektrons (ebene Wellen), wenn das Magnetfeld gegen Null, $n \to \infty$ geht und das Produkt $n \cdot H$ konstant bleibt; hier bedeutet n die Landau sche magnetische Quantenzahl.

b. Sie erfüllt die Harper sche Symmetrie-Bedingung für eine beliebige Verschiebung des Ortsvektors $\vec{r}$.

c. Sie gibt eine anschauliche Deutung des Vektors $\vec{k}$ in Anwesenheit des Vektorpotentials $\vec{A}(\vec{r})$ und eine Beschreibung des klassischen Bewegungsgesetztes des Elektrons im Magnetfeld. Die Eigenfunktion (1.16) wird im folgenden als Schrauben-Funktion bezeichnet.

Für ein dreifach periodisches Gitterpotential und homogenes Magnetfeld wird ein Ansatz für die Eigenfunktion gemacht, welcher zugleich die Harper'sche Symmetrie-Bedingung berücksichtigt und formal die Gestalt der Harper'schen Lösung hat (Harper [7], Seite 881, Formel (1.6)).

Für die Koeffizienten dieses Ansatzes ergibt sich ein unendliches Rekursions-System, welches für verschiedene Fälle näherungsweise gelöst wird.

---

14. R. Dingle, Proc. Roy. Soc. (London) A, 211. 500, 517 (1952)

I. Allgemeine Eigenschaften der Eigenfunktionen

1. Die Harper sche Periodizitäts-Symmetriebedingung

Das Verhalten der Leitungselektronen in einem Metall und in einem homogenen Magnetfeld $\vec{H}$ läßt sich in einer für viele Überlegungen brauchbaren Näherung durch die Annahme beschreiben, daß sich die Elektronen unabhängig voneinander in einem dreifach periodischen räumlichen Potential mit der potentiellen Energie $V(\vec{r})$ bewegen. In diesem Fall lautet die Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\nabla-\frac{i}{c}\vec{A}(\vec{r})\right)^2+V(\vec{r})-E\right]\cdot\psi(\vec{r})=0 \qquad (1.1)$$

(in atomaren Einheiten $\hbar = 1$, $m = 1$, $e = 1$), wobei $H = \mathrm{rot}\,\vec{A}(\vec{r})$ und das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r})$ linear in den Koordinaten $\vec{r}$ ist.

Für die potentielle Energie gilt:

$$V(\vec{r}+\vec{a}_j)=V(\vec{r}) \qquad (1.2)$$

wobei $\vec{a}_j$ $(j = 1, 2, 3)$ die Basisvektoren des Gitters bezeichnet. Wir legen die Z-Achse in die Richtung des Magnetfeldes H und betrachten das Vektorpotential in folgender Form

$$\vec{A}(\vec{r})=\frac{1}{2}\left|\vec{H}\times\vec{r}\right| \qquad (1.3)$$

damit ergibt sich für (1.1):

$$\Delta\psi-iB\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y}-y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)+\left[2\left(E-V(\vec{r})\right)-\frac{B^2}{4}(x^2+y^2)\right]\psi=0 \qquad (1.4)$$

Dabei ist $B = \frac{H}{c}$.

In gebräuchlichen Einheiten haben wir $B = \frac{e.H}{\hbar c}$ zu definieren; B hat dann die Dimension einer reziproken Fläche. Die Länge $L = \sqrt{\frac{ch}{eH}} \sim 10^{-5}$ cm $(H \sim 10^4)$ wird oft für typisch eyperimentelle Untersuchungen der Zyklotron-Resonanzen verwendet; sie ist viel größer als die Gitterkonstante.

Wir halten B immer positiv, denn die Lösung der Gleichung (1.4) für negative B erhalten wir formal, wenn Ψ durch Ψ^* ersetzt wird.

Zur Lösung der Gleichung (1.4) machen wir für die Eigenfunktion den allgemeinen Ansatz:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i(\vec{k},\vec{r})} \cdot U_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{1.5}$$

Für das Magnetfeld Null ist die Funktion $U_{\vec{k}}(\vec{r})$ gitterperiodisch und k ist die Bloch-sche Quantenzahl.
Durch Einsetzen von (1.5) in (1.4) ergibt sich für die Funktion $U_k(\vec{r})$ die Differentialgleichung (1.6):

$$\Delta U_{\vec{k}} + 2i\left(k_x + \frac{B}{2}y\right)\frac{\partial U_{\vec{k}}}{\partial x} + 2i\left(k_y - \frac{B}{2}x\right)\frac{\partial U_{\vec{k}}}{\partial y} + 2ik_z\frac{\partial U_{\vec{k}}}{\partial z}$$
$$+\left[2\left(E - V(\vec{r})\right) - \left(k_x + \frac{B}{2}y\right)^2 - \left(k_y - \frac{B}{2}x\right)^2 - k_z^2\right] U_{\vec{k}} = 0 \tag{1.6}$$

Mit Hilfe der neuen Variablen

$$K_x = k_x + \frac{B}{2}y \quad , \quad K_y = k_y - \frac{B}{2}x \tag{1.7}$$

erhalten wir

$$\left\{\frac{B^2}{4}\left(\frac{\partial^2}{\partial K_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial K_y^2}\right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - iB\left(K_x\frac{\partial}{\partial K_y} - K_y\frac{\partial}{\partial K_x}\right) + 2ik_z\frac{\partial}{\partial z}\right.$$
$$\left.+\left[2\left(E - V\left(\frac{2}{B}(k_y - K_y), \frac{2}{B}(K_x - k_x), z\right)\right) - K_x^2 - K_y^2 - k_z^2\right]\right\} U_{\vec{k}} = 0 \tag{1.8}$$

Da die Gleichung (1.8) invariant gegen Verschiebungen von $\vec{r}$ um $-\vec{a}_j$ und $\vec{k}$ um $-\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{a}_j)$ bleibt, hat die Funktion $U_k(K_x, K_y, z)$ folgende Eigenschaft

$$U_{\vec{k}-\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{a}_j)}(K_x, K_y, z+a_3) = U_{\vec{k}}(K_x, K_y, z) \tag{1.9}$$

Für die Energie, die ebenfalls eine Funktion von $\vec{k}$ ist, folgt in der gleichen Weise

$$E(\vec{k}-\tfrac{1}{c}\vec{A}(\vec{a}_j)) = E(\vec{k}) \tag{1.10}$$

Nach (1.9) hat die Eigenfunktion $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ folgende Symmetrie-Eigenschaft

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{a}_j) = e^{i(\vec{k},\vec{a}_j)+\frac{1}{c}(\vec{A}(\vec{a}_j)),\vec{r})} \cdot \psi_{\vec{k}-\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{a}_j)}(\vec{r}) \tag{1.11}$$

welche zuerst von H a r p e r [7] abgeleitet wurde und im folgenden als Harper-sche Symmetrie-Eigenschaft bezeichnet wird.

Zur Lösung der Gleichung (1.8) setzt man

$$U_{\vec{k}}(K_x, K_y, Z) = e^{-\frac{1}{B}(K_x^2+K_y^2)}\,\varphi_{\vec{k}}(K_x, K_y, Z) \tag{1.12}$$

und erhält für die Funktion $\varphi_{\vec{k}}(K_x, K_y, z)$ eine bequemere Gleichung

$$\left\{\frac{B^2}{4}\left(\frac{\partial^2}{\partial K_x^2}+\frac{\partial^2}{\partial K_y^2}\right)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}-B(K_y+iK_x)\cdot\left(\frac{\partial}{\partial K_y}-i\frac{\partial}{\partial K_x}\right)+2ikz\frac{\partial}{\partial z}\right. \tag{1.13}$$

$$\left.+\left[2\left(E-V(K_x, K_y, z)\right)-B-k_z^2\right]\right\}\varphi_{\vec{k}}(k_x, K_y, z) = 0$$

in der die Quadrate k_x^2, k_y^2 nicht mehr auftreten. Nun werden mit Hilfe dieser Gleichung einige spezielle Probleme behandelt.

2. Freie Elektronen im Magnetfeld

Dieser Fall entspricht einem Potential $V(\vec{r}) = 0$ in der Gleichung (1.13). Die Lösung wird von der Ortskoordinate z unabhängig und lautet dann

$$\varphi_{\vec{k}}(k_x, k_y, z) = C \cdot (k_y + i\, k_x)^n \tag{1.14}$$

C ist ein Normierungsfaktor.

Die zugehörige Energie ist gegeben durch

$$E = B\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2} k_z^2 \tag{1.15}$$

Die Zahl $n = 0, 1, 2, \ldots$ ist die Landau-sche magnetische Quantenzahl. Die normierte Eigenfunktion zur Energie (1.15) lautet:

$$\psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) = \left[\frac{B}{2\pi}\left(\frac{2}{B}\right)^n \frac{1}{n!}\right]^{1/2} \cdot e^{-\frac{1}{B}(k_x^2 + k_y^2) + i(\vec{k},\vec{r})} \cdot (-k_y - i k_x)^n \tag{1.16}$$

Die Eigenfunktion (1.16) ist eine Schrauben-Funktion, und ihr Zentrum wird durch den Vektor $\vec{r}_M\left(x_M = \frac{2}{B} k_y,\ y_M = -\frac{2}{B} k_x\right)$ bestimmt.

Für $\vec{k} = \frac{1}{c}\vec{A}(\vec{r}_M)$ folgt

$$\psi'_{k_z,n}(\vec{r},\vec{r}_M) = \left[\frac{B}{2\pi}\left(\frac{B}{2}\right)^n \frac{1}{n!}\right]^{1/2} \left[(x - x_M) - i(y - y_M)\right]^n \cdot \exp\left\{-\frac{B}{4}\left[(x - x_M)^2 + (y - y_M)^2\right] + i\frac{B}{2}(x_M y - x y_M) + k_z z\right\} \tag{1.17}$$

und die k_x, k_y sind proportional zu den Komponenten des Vektorpotentials im Zentrum der Schraube.

Die Eigenfunktion (1.17) hat in Zylinderkoordinaten das Aussehen

$$\psi_{k_z,n} = \left[\frac{B}{2\pi}\left(\frac{B}{2}\right)^n \frac{1}{n!}\right]^{1/2} \cdot e^{-\frac{B}{4}\rho^2 + \frac{i}{c}(\vec{A}(\vec{r}_M),\, \vec{r}-\vec{r}_M) + i k_z z} \cdot \rho^n e^{-in\theta} \tag{1.18}$$

Dabei ist

$$\rho^2 = (x - x_M)^2 + (y - y_M)^2 \quad \text{und} \quad \theta = \operatorname{arctg} \frac{y - y_M}{x - x_M} \tag{1.19}$$

Die Schrauben-Funktionen erfüllen die Vollständigkeitsrelation und für gleiche $\vec{k}$ sind sie zueinander orthogonal.

Es gilt nämlich

$$\sum_{\vec{k},n} \psi^*_{\vec{k},n}(\vec{r}') \cdot \psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \int \psi^*_{\vec{k},n}(\vec{r}') \cdot \psi_{\vec{k},n}(\vec{r})\, d^3k = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{1.20}$$

$$\left(\psi^*_{k',n'}(\vec{r}),\, \psi_{k,n}(\vec{r})\right) = \exp\left(-\frac{1}{B}\left[(k_x - k_x')^2 + (k_y - k_y')^2 + 2i(k_x' k_y - k_x k_y')\right]\right) \delta_{nn'} \tag{1.21}$$

$$\left(\psi^*_{\vec{k},n'}(\vec{r}),\, \psi_{\vec{k},n}(\vec{r})\right) = \delta_{nn'} \tag{1.22}$$

Die Schrauben-Funktion (1.16) hat folgende Eigenschaften:

a) Sie erfüllt die Harper-sche Symmetrie-Bedingung (1.11) für jede Verschiebung $\vec{r}_0$ des Ortsvektors $\vec{r}$:

$$\psi_{\vec{k},n}(\vec{r}+\vec{r}_0) = e^{i(\vec{k},\vec{r}_0)+\frac{i}{c}(\vec{A}(\vec{r}_0),\vec{r})} \cdot \psi_{\vec{k}-\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{r}_0),n}(\vec{r}) \qquad (1.23)$$

b) Sie geht stetig über in die Eigen-Funktion des freien Elektrons (ebene Wellen) im Grenzfall Magnetfeld gegen Null, $n \to \infty$ und $n \cdot B \to 1/2 \quad (k_x^2 + k_y^2)$

Das läßt sich auf folgende Weise zeigen:

Die Variablen K_x, K_y (1.7) werden für $B = 0$ gleich k_x, k_y. Daraus folgt für die Eigenfunktion (1.16):

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left[\frac{B}{2\pi}\left(\frac{2}{B}\right)^n \frac{1}{n!}\right]^{1/2} e^{-\frac{1}{B}(k_x^2+k_y^2)} \cdot (-k_y - i k_x)^n e^{i(\vec{k},\vec{r})}$$

mit dem Energie-Eigenwert $E = \frac{1}{2}k^2$.

c) Die Eigenfunktion von Landau läßt sich aus (1.16) durch Integration über einen Parameter herstellen und umgekehrt[12].

d) Die Eigenfunktion von D i n g l e [14] läßt sich auch aus (1.16) durch Integration über zwei Parameter herstellen[12].

e) Die Schrauben-Funktion entspricht der klassischen Bewegung des Elektrons in einem Magnetfeld, und zwar haben wir nach der klassischen Theorie eine Kreisbewegung in der (XY)-Ebene mit dem Mittelpunkt (X_M, Y_M) und mit der Frequenz Ω (gerade dieser Teil der Energie wird gequantelt) und eine freie Bewegung längs der Z-Achse.

3. Anschauliche Darstellung für freie Elektronen im Magnetfeld

Die Größen k_x, k_y gehen in die Eigenwerte (1.15) nicht ein. Da sie beliebige Werte annehmen können, ist das Problem noch in kontinuierlicher Weise entartet. Wir können das Resultat (1.15) so deuten, daß in der Z-Richtung das Elektron frei beweglich ist und damit beliebige Energiewerte $E_z = 1/2\, k_z^2$ annehmen kann, während in der Komponenten senkrecht zu Z nur diskrete Energie-Werte B (n + 1/2) erlaubt sind.

Ferner läßt sich mit Hilfe der Schrauben-Funktionen und der Energie-Formel (1.15) zeigen, daß zur Energie B (n + 1/2) genau so viele Zustände gehören, wie ohne Magnetfeld, die im Energieintervall zwischen B . n und B . (n + 1) liegen, d.h. jedes diskrete Niveau enthält so viele Energiezustände, wie sich im feldfreien Fall im Energiebereich ΔE = B befinden.

Diese Anzahl ist dem Magnetfeld H proportional. Der energetische Einfluß des Magnetfeldes besteht also darin, daß alle Eigenwerte des Intervalles zwischen Bn und B (n + 1) in den dazwischen liegenden Wert B (n + 1/2) hineinrücken.

Beim Grenzübergang zum Magnetfeld Null geht die Struktur des Energiekontinuums nicht verloren, weil die Schrauben-Funktionen (1.16) bei dem Grenzübergang: Magentfeld gegen Null, $n \to \infty$ und B . n konstant in die Eigenfunktionen des freien Elektrons übergehen (ebene Wellen).

Die Energieformel (1.15) geht auch in die Energieformel des freien Elektrons ($E = 1/2\ (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$; Kontinuum) über, wenn man für B (n + 1/2) die Nebenbedingung

$$B\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \to \tfrac{1}{2}\left(k_x^2 + k_y^2\right) \qquad (1.24)$$

stellt.

Die Nebenbedingung (1.24) ist wichtig, und mit ihr bekommen wir eine einfache Darstellung.

Es ist

$$k_x^2 + k_y^2 = k_0^2 = B(2n+1)$$

oder

$$\frac{k_0^2}{2B} = \frac{E_0}{B} = n + \frac{1}{2} \tag{1.25}$$

Diese Bedingung gibt das Verhältnis der Energie E_0 (ohne Magnetfeld) zu der magnetischen Energie B an, die gleich dem Abstand zweier Landau-scher Niveaus ist.

Die Bedingung $\frac{k_0^2}{B} = 2n+1$ hat auch eine anschauliche Bedeutung: Sie gibt das Verhältnis der Fläche einer Einheitszelle im Wellenvektor-Raum mit der Kante k_0 zu der Fläche B, welche das Elektron im Magnetfeld umläuft. Wie wir gesehen haben, ist dieses Verhältnis immer eine ganze Zahl.

Mit Hilfe der Bedingung (1. 25) kann folgendes gesagt werden:

Bei gegebenem Magnetfeld H kann man N = n + 1 Landau-sche Niveaus in ein Energieniveau $E_0 = 1/2\ (k_x^2 + k_y^2)$ (ohne Magnetfeld) unterbringen.

II. Gitterelektronen im Magnetfeld

1. Die geeignete Eigenfunktion

Die potentielle Energie $V(\vec{r})$ in der Gleichung (1.4) entwickeln wir in eine Fourier-Reihe

$$V(\vec{r}) = \sum_g V(g)\, e^{2\pi i (\vec{r}, \vec{\tilde{r}}_g)} \tag{2.1}$$

mit $\vec{\tilde{r}}_g = \left(\frac{g_1}{a_1}, \frac{g_2}{a_2}, \frac{g_3}{a_3}\right)$ g_1, g_2, g_3 ganze Zahlen.

Diese Fourier-Reihe setzen wir in die Differentialgleichung (1.4) ein und versuchen mit dem Ansatz

$$\Psi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2\pi}{B}} \sum_g \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{F_g^{\ell}(\vec{k})}{\sqrt{\ell!}}\, \Psi_{\vec{k}+2\pi\vec{\tilde{r}}_g, \ell}\left(\vec{r} - \frac{4}{cB^2}\vec{A}(2\pi\vec{\tilde{r}}_g)\right) \tag{2.2}$$

die Gleichung (1.4) zu lösen: Hierbei bedeutet

$\Psi_{\vec{k}+2\pi\vec{\tilde{r}}_g, \ell}\left(\vec{r} - \frac{4}{cB^2}\vec{A}(2\pi\vec{\tilde{r}}_g)\right)$ eine Schrauben-Funktion (1.16).

Dieser Ansatz befriedigt die Schrödinger-Gleichung (1.4), wenn die Koeffizienten $F_g^1(\vec{k})$ der Gleichung (2.6) genügen, und berücksichtigt die Harper-sche Symmetriebedingung.

Um besser einzusehen, wie der Ansatz (2.2) zustande kommt, schreiben wir

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_g \sum_{\ell=0}^{\infty} \mathcal{U}_g^{\ell}(\vec{K})\, e^{i(\vec{K} + 2\pi\vec{\tilde{r}}_g)\cdot\vec{r}} \tag{2.3}$$

dabei ist

$$\mathcal{U}_g^{\ell}(\vec{K}) = \sqrt{\left(\frac{2}{B}\right)^{\ell}\frac{1}{\ell!}}\, \exp\left(-\frac{1}{B}(K_x^2 + K_y^2) - \frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1}{a_1}k_y - \frac{g_2}{a_2}k_x\right)\right)\cdot(-K_y - iK_x)^{\ell}\frac{F_g^{\ell}(\vec{k})}{\sqrt{\ell!}}$$

und

$$\vec{K} = \vec{k} - \frac{1}{c}\vec{A}(\vec{r}) \tag{2.4}$$

Die Formel (2.3) kann auch in folgender Form geschrieben werden:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\sum_{g} U_g^{\ell}(\vec{K}) \cdot e^{i(\vec{K} + 2\pi \vec{\tau}_g) \cdot \vec{r}} \right) \tag{2.5}$$

In dieser Gleichung steht unter der Summe über g formal die Eigenfunktion des Elektrons im Kristall (ohne Magnetfeld), aber mit dem Vektor $\vec{K}$ anstelle des Wellenvektors $\vec{k}$.
Der Ansatz (2.2) hat noch formal die Gestalt der Harper-schen Lösung und bedeutet folgendes:

Die richtigen Eigenfunktionen der Kristallgitterelektronen im homogenen Magnetfeld lassen sich aufbauen als lineare Kombinationen von Schrauben-Funktionen, die mit der Gitterperiodizität periodisch liegen und noch geeignet phasenverschoben sind. (Der Ansatz (2.2) kann auch aus dem Harper schen Formalismus abgeleitet werden. Siehe Anhang I.) Setzt man (2.2) in (1.4) ein, dann ergibt sich

$$\sum_{g} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi}{B}} \frac{1}{\sqrt{\ell!}} \cdot \Psi_{\vec{k}+2\pi\vec{\tau}_g, \ell} \left(\vec{r} - \frac{4}{cB^2} \vec{A}(2\pi\vec{\tau}_g)\right) \cdot \Big\{ 2\pi\sqrt{2B} \cdot \Big[\left(\frac{g_2}{a_2} + i\frac{g_1}{a_1}\right) F_g^{\ell}$$

$$+ \ell \left(\frac{g_1}{a_1} - i\frac{g_1}{a_1}\right) F_g^{\ell-1} \Big] + \Big[2E - B(2\ell+1) - 4\pi^2 \left(\frac{g_1^2}{a_1^2} + \frac{g_2^2}{a_2^2}\right) - \left(k_z + \frac{2\pi}{a_3} g_3\right)^2 \Big] \cdot F_g^{\ell}$$

$$- 2 \sum_{g'} F_{g-g'}^{\ell} V(g') \exp\left[\frac{4\pi i}{B} \left(\frac{g_1'}{a_1} k_y - \frac{g_2'}{a_2} k_x \right) \right] \Big\} = 0$$

Diese Summe verschwindet nur dann, wenn der Faktor von $\Psi_{\vec{k}+2\pi\vec{\tau}_g, \ell}\left(\vec{r} - \frac{4}{cB^2}\vec{A}(2\pi\vec{\tau}_g)\right)$ gleich Null ist. Somit ergibt sich folgende Beziehung zwischen den Koeffizienten $F_g^1(\vec{k})$ der Eigenfunktion:

$$2\pi\sqrt{2B}\left[\left(\frac{g_2}{a_2}+i\frac{g_1}{a_1}\right)F_g^{\ell+1}+\ell\left(\frac{g_2}{a_2}-i\frac{g_1}{a_1}\right)\cdot F_g^{\ell-1}\right]$$

$$+\left[2E-B(2\ell+1)-4\pi^2\left(\frac{g_1^2}{a_1^2}+\frac{g_2^2}{a_2^2}\right)-\left(k_z+\frac{2\pi}{a_3}g_3\right)^2\right]\cdot F_g^{\ell}$$

$$=2\sum_{g'}F_{g-g'}^{\ell}V(g')\exp\left[\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g'_1}{a_1}k_y-\frac{g'_2}{a_2}k_x\right)\right] \tag{2.6}$$

Die Indizes g, g', $g-g'$ stehen jeweils für ein Indextripel, z.B. $g-g'$ für $g_1-g'_1$, $g_2-g'_2$, $g_3-g'_3$; die Summe rechts geht über alle ganzzahligen Werte von g'_1, g'_2, g'_3. Die Koeffizienten $F_g^1(\vec{k})$ sind periodische Funktionen von $\vec{k}$ mit der Periode $\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{a}_j)$, weil sich die Gleichung (2.6) bei einer Verschiebung des Vektors $\vec{k}$ um $\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{a}_j)$ nicht ändert. Die Energie $E(\vec{k})$ bleibt ebenfalls konstant.

2. Zweidimensionales periodisches Potential

Das unendliche Rekursions-System (2.6) wird zunächst für ein ebenes Gitterpotential gelöst werden, weil in Anwesenheit des Potentials in der Z-Richtung die Lösung sehr kompliziert ist. Wir beschränken uns daher jetzt auf das ebene Gitterpotential:

$$V(\vec{r})=\sum_{g'_1 g_2}V(g_1,g_2)\,e^{2\pi i\left(\frac{g_1}{a_1}x+\frac{g_2}{a_2}y\right)} \tag{2.7}$$

Dann ergibt sich aus (2.6) für $g_3 = g'_3 = 0$ folgendes:

$$2\pi\sqrt{2B}\left[\left(\frac{g_2}{a_2}+i\frac{g_1}{a_1}\right)F_{g_1,g_2}^{\ell+1}+\ell\left(\frac{g_2}{a_2}-i\frac{g_1}{a_1}\right)F_{g_1,g_2}^{\ell-1}\right] \tag{2.8}$$

$$+\left[2E-k_z^2-B(2\ell+1)-4\pi^2\left(\frac{g_1^2}{a_1^2}+\frac{g_2^2}{a_2^2}\right)\right]\cdot F_{g_1,g_2}^{\ell}=$$

$$2\sum_{g'_1,g'_2}F_{g_1-g'_1,g_2-g'_2}^{\ell}V(g'_1,g'_2)\exp\left|\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1}{a_1}k_y-\frac{g_2}{a_2}k_x\right)\right|$$

In nullter Näherung setzen wir die rechte Seite von (2.8) gleich Null, also gehen wir von dem Fall freier Elektronen aus. Diese Näherung gilt, solange die Fourier-Koeffizienten $V(g_1, g_2)$ die Bedingung erfüllen:

$$V(g_1, g_2) \ll 2\frac{\pi^2}{a^2} \tag{2.9}$$

(In gebräuchlichen Einheiten lautet die Bedingung (2.9)

$$V(g_1, g_2) \ll \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$$

Für $\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-27}$ ergs, $m = 9{,}11 \cdot 10^{-28}$ gr und $a = 3{,}10^{-8}$ cm folgt

$$V(g_1, g_2) \ll 23 \text{ e-Volt}$$

also klein gegen das mittlere Gitterpotential $V_o \sim 23$ e-Volt.)
Für diesen Fall lautet die Lösung [12]

$$F^{-l}_{g_1, g_2} = (-1)^{n+l}\frac{l!}{n!}\, e^{-\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{g_2^2}{\alpha_2^2}\right)} \left(\pi\sqrt{\frac{2}{B}}\left(\frac{g_2}{\alpha_1}+i\frac{g_1}{\alpha_1}\right)\right)^{n-l} \cdot L_l^{n-l}\left[\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{g_2^2}{\alpha_2^2}\right)\right] \tag{2.10}$$

mit $E_o = B\,(n + 1/2) + 1/2\, k_z^2$ (1.15)

Die $L_l^{n-l}(x)$ sind die verallgemeinerten Laguerre schen Polynome in der von Magnus-Oberhettinger [15] angegebenen Form.

Für $l = n$ ergibt sich

$$F^{n}_{g_1, g_2} = e^{-\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{g_2^2}{\alpha_2^2}\right)} \cdot L_n\left(\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{g_2^2}{\alpha_2^2}\right)\right)$$

---

15. W. Magnus, F. Oberhettinger, Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der Math. Physik (Springer-Verlag)

und für $g_1 = 0$, $g_2 = 0$ folgt einfach $F^n_{o,o} = 1$ sonst Null. Gehen wir mit dem Resultat (2.10) in die Gleichung (2.8), dann erhalten wir als erste Näherung für die Energie E mit $g_1 = 0$, $g_2 = 0$ und $1 = n$

$$E = B(n+\tfrac{1}{2}) + \tfrac{1}{2} k_z^2 + \sum_{g_1', g_2'} V(g_1', g_2')\, e^{\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1'}{a_1} k_y - \frac{g_2'}{a_2} k_x\right)} F^n_{-g_1', -g_2'}$$

oder

$$E = B(n+\tfrac{1}{2}) + \tfrac{1}{2} k_z^2 + \sum_{g_1, g_2} V(g_1, g_2)\, L_n\left(\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{a_1^2} + \frac{g_2^2}{a_2^2}\right)\right)$$

$$\exp\left\{\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1}{a_1} k_y - \frac{g_2}{a_2} k_x\right) - \frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{a_1^2} + \frac{g_2^2}{a_2^2}\right)\right\} \tag{2.11}$$

wobei g_1', $g_2' = g_1$, g_2 gesetzt sind.

Bemerkung: Für den Fall $a_1 = a_2 = a$ ergibt sich

$$E = B(n+\tfrac{1}{2}) + \tfrac{1}{2} k_z^2 + \sum_{g_1, g_2} V(g_1, g_2) \cdot L_n\left(\frac{2\pi^2}{Ba^2}(g_1^2 + g_2^2)\right). \tag{2.12}$$

$$\exp\left\{\frac{4\pi i}{Ba}(g_1 k_y - g_2 k_x) - \frac{2\pi^2}{Ba^2}(g_1^2 + g_2^2)\right\}$$

Das Produkt $a^2 \cdot B$ hat eine einfache anschauliche Bedeutung. Ihm entspricht das Verhältnis der Fläche einer Einheitszelle des Gitters zu der kleinsten Fläche, welche das Elektron im Magnetfeld H umläuft.

Die dimensionslose Konstante $\dfrac{\pi^2}{2B\,a^2}$ hat auch eine einfache physikalische Bedeutung. Sie gibt das Verhältnis der Energie $1/2 \dfrac{\pi^2}{a^2}$ zu dem Abstand zweier Landau scher Niveaus B.

Für alle wirklichen Felder ist immer $\dfrac{\pi^2}{2Ba^2} \gg 1$.

3. Cosinusförmiges dreidimensionales Potential

Über die Eigenschaften der Rekursions-Gleichung (2.6) und damit der Elektronen im homogenen Magnetfeld und in einem realen Metall kann

man sich qualitativ oriantieren, indem man den speziellen Fall eines kubischen Gitters mit der Gitterkonstanten a und einem Potential

$$V(\vec{r}) = V_0 + 2V\left(\cos\frac{2\pi}{a}x + \cos\frac{2\pi}{a}y + \cos\frac{2\pi}{a}z\right) \tag{2.13}$$

($V > 0$) studiert.

Für das Potential (2.13) gelten folgende Werte g_1', g_2', g_3' in (2.6)

$$g_1' = \pm 1 \qquad g_1' = 0 \qquad g_1' = 0$$

$$g_2' = 0 \qquad g_2' = \pm 1 \qquad g_2' = 0$$

$$g_3' = 0 \qquad g_3' = 0 \qquad g_3' = \pm 1;$$

dann ergibt sich aus Gleichung (2.6)

$$\begin{aligned} & d\left[(g_2+ig_1)F^{\ell+1}_{g_1,g_2,g_3} + \ell(g_2-ig_1)F^{\ell-1}_{g_1,g_2,g_3}\right] \\ & + \left[\bar{E} - d^2\left(\ell+\frac{1}{2}\right) - g_1^2 - g_2^2 - \left(g_3+\frac{\alpha k_z}{2\pi}\right)^2\right]F^{\ell}_{g_1,g_2,g_3} \\ & = \frac{\alpha^2 V}{2\pi^2}\Big\{F^{\ell}_{g_1+1,g_2,g_3}\, e^{-\frac{4\pi i}{B\alpha}k_y} + F^{\ell}_{g_1-1,g_2,g_3}\, e^{\frac{4\pi i}{B\alpha}k_y} \\ & + F^{\ell}_{g_1,g_2+1,g_3}\, e^{\frac{4\pi i}{B\alpha}k_x} + F^{\ell}_{g_1,g_2-1,g_3}\, e^{-\frac{4\pi i}{B\alpha}k_x} + F^{\ell}_{g_1,g_2,g_3+1} + F^{\ell}_{g_1,g_2,g_3-1}\Big\} \end{aligned} \tag{2.14}$$

Dabei ist gesetzt

$$\bar{E} = \frac{\alpha^2}{2\pi^2}(E - V_0) \quad \text{und} \quad d^2 = \frac{B\alpha^2}{2\pi^2} \tag{2.15}$$

Die Gleichung (2.14) läßt sich in den Variablen (g_1, g_2) und g_3 separieren; indem man für $F^1_g(\vec{k})$ den Ansatz

$$F^{\ell}_{g_1,g_2,g_3} = F^{\ell}_{g_1,g_2} \cdot F_{g_3} \tag{2.16}$$

macht, ergibt sich

$$d\left[(g_2+ig_1)F^{\ell+1}_{g_1,g_2}+\ell(g_2-ig_1)F^{\ell-1}_{g_1,g_2}\right]+\left[E_1-d^2\left(\ell+\frac{1}{2}\right)-g_1^2-g_2^2\right]F^{\ell}_{g_1,g_2}$$

$$=\frac{\alpha^2 V}{2\pi^2}\left\{F^{\ell}_{g_1+1,g_2}e^{-\frac{4\pi i}{B\alpha}k_y}+F^{\ell}_{g_1-1,g_2}e^{\frac{4\pi i}{B\alpha}k_y}\right.$$

$$\left.+F^{\ell}_{g_1,g_2+1}e^{\frac{4\pi i}{B\alpha}k_x}+F^{\ell}_{g_1,g_2-1}e^{-\frac{4\pi i}{B\alpha}k_x}\right\} \qquad (2.17)$$

und

$$\left[E_2-\left(g_3+\frac{k_z\alpha}{2\pi}\right)^2\right]F_{g_3}=\frac{\alpha^2 V}{2\pi^2}\left[F_{g_3+1}+F_{g_3-1}\right] \qquad (2.18)$$

mit den Parametern E_1, E_2, die der Bedingung $E = E_1 + E_2$ genügen. Die Gleichung (2.18) ist eine bekannte Rekursionsgleichung, die bereits von einigen Autoren [16, 17] untersucht wurde. Sie bestimmen die Eigenwerte durch die Gleichung:

$$E_2=\frac{1}{4}E_{\frac{k_z\alpha}{\pi}}\left(2\frac{\alpha^2 V}{\pi^2}\right) \qquad (2.19)$$

Dabei bedeutet $E_{\frac{k_z\alpha}{\pi}}\left(2\frac{\alpha^2 V}{\pi^2}\right)$ den Eigenwert einer Mathieuschen Differentialgleichung. Die erlaubten Energiewerte E_2 erfüllen Bereiche, die man in der Metalltheorie als Energie-Bänder bezeichnet. Sie werden mit zunehmender Höhe V der Potentialschwelle schmäler. Die Gleichung (2.17) ist bereits studiert worden; sie ist ein spezieller Fall von (2.8) und wir können die Eigenwerte schreiben

$$E_1=d^2\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\alpha^2 V}{\pi^2}e^{-\frac{1}{d^2}}L_n\left(\frac{1}{d^2}\right)\left(\cos\frac{4\pi k_x}{B\alpha}+\cos\frac{4\pi k_y}{B\alpha}\right) \qquad (2.20)$$

---

16. J. Slater, Phys. Rev. 87, 807 (1952)
17. J. Meixner, F. Schäfke, Mathieusche Funktionen und Sphäroedfunktionen (Springer-Verlag 1954), Seite 383

Die genäherten Eigenwerte für das Potential (2.13) lauten daher

$$E = V_0 + B(n+\tfrac{1}{2}) + \frac{\pi^2}{2a^2} E_{\frac{k_z a}{\pi}}\left(2\frac{a^2 V}{\pi^2}\right)$$

$$+ 2V e^{-\frac{1}{d^2}} L_n\left(\frac{1}{d^2}\right)\left(\cos\frac{4\pi}{Ba}k_x + \cos\frac{4\pi}{Ba}k_y\right) \tag{2.21}$$

4. <u>Störungsrechnung und die Bloch sche Summe mit Schrauben-Funktionen</u>

Die Resultate (2.11) können wir auch mit einer Störungsrechnung im Sinne des Bloch schen Verfahrens ableiten.

Wir betrachten jetzt das Zentrum der Schrauben-Funktion $\psi_{k_z,n}(\vec{r},\vec{r}_M)$ (1.17) an der Stelle eines Gitterpunktes $\vec{r}_M = \vec{r}_g$ $(g_1 a_1,\ g_2 a_2)$. Die Funktion $\psi_{k_z,n}(\vec{r},\vec{r}_M)$ erfüllt die Schrödinger-Gleichung (1.4) für $V = 0$. Für den Fall, daß $V \neq 0$ und V periodisch in der x, y-Richtung ist, machen wir für die Lösung von (1.4) den Ansatz

$$E = E_0 + \mathcal{E},\quad \psi(r) = \sum_{g_1,g_2} A_{g_1,g_2}\,\psi_{k_z,n}(\vec{r},\vec{r}_g) + f(\vec{r}) \tag{2.22}$$

wobei $\mathcal{E}$ und f kleine Größen sein sollen, ($\mathcal{E} \ll E_0$ und $f \ll \psi_{k_z,n}$) deren Produkte und höhere Potenzen zu vernachlässigen sind. Dann wird aus (1.4)

$$\Delta f - iB\left(x\frac{\partial f}{\partial y} - y\frac{\partial f}{\partial x}\right) + \left[2E_0 - 2V(\vec{r}) - \frac{B^2}{4}(x^2+y^2)\right]\cdot f$$

$$= -2\sum_{g_1,g_2} A_{g_1,g_2}\,\psi_{k_z,n}(\vec{r},\vec{r}_g)\cdot\left[\mathcal{E} - V(\vec{r})\right] \tag{2.23}$$

Damit diese inhomogene Gleichung in f überhaupt eine Lösung hat, muß die rechte Seite auf den Lösungen der homogenen senkrecht stehen.

Aus dieser Forderung folgt:

$$\sum_{g_1 g_2} A_{g_1, g_2} \int \left[\mathcal{E} - V(\vec{r}) \right] \psi^*_{k_z, n}(\vec{r}, \vec{r}_g) \psi_{k_z, n}(\vec{r}, \vec{r}_g) \, d\tau = 0 \tag{2.24}$$

Unter Berücksichtigung von Eigenschaften der Schrauben-Funktionen und der Matrixelemente des Exponential-Operators $\exp. i(\vec{r} \cdot \vec{r}_g)$ mit Schrauben-Funktionen ergibt sich näherungsweise für die Koeffizienten A_{g_1, g_2} die Gleichung:

$$\mathcal{E} A_{g_1, g_2} = \sum_{g_1', g_2'} V(g_1', g_2') \exp\left(-\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{a_1^2} + \frac{g_2^2}{a_2^2}\right)\right) \cdot L_n\left(\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{a_1^2} + \frac{g_2^2}{a_2^2}\right)\right) \cdot \cdot A_{g_1 - \frac{4\pi g_2'}{B a_1 a_2}, g_2 + \frac{4\pi g_1'}{B a_1 a_2}} \tag{2.25}$$

Die Gleichung (2.25) besitzt die Lösung

$$A_{g_1, g_2} = \exp. i(g_1 a_1 k_x + g_2 a_2 k_y) \tag{2.26}$$

wenn man den Parameter $\mathcal{E}$ den Wert erteilt:

$$\mathcal{E} = \sum_{g_1', g_2'} V(g_1', g_2') \exp\left\{\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1'}{a_1} k_y - \frac{g_2'}{a_2} k_x\right) - \frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1'^2}{a_1^2} + \frac{g_2'^2}{a_2^2}\right)\right\} L_n\left(\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1'^2}{a_1^2} + \frac{g_2'^2}{a_2^2}\right)\right) \tag{2.27}$$

Die Gesamtheit der Eigenfunktionen "nullter Näherung" zur Energie

$$E = B(n + \tfrac{1}{2}) + \tfrac{1}{2} k_z^2 + \sum_{g_1', g_2'} V(g_1', g_2') L_n\left(\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1'^2}{a_1^2} + \frac{g_2'^2}{a_2^2}\right)\right) \exp.\left\{\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1'}{a_1} k_y - \frac{g_2'}{a_2} k_x\right) - \frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1'^2}{a_1^2} + \frac{g_2'^2}{a_2^2}\right)\right\} \tag{2.28}$$

lautet

$$\psi(\vec{r}) = \sum_g e^{i(\vec{k}, \vec{r}_g)} \psi_{k_z, n}(\vec{r}, \vec{r}_g) \tag{2.29}$$

Die Energieformel (2.28) für $g_1', g_2' = g_1 \quad g_2$ ist identisch mit (2.11). Die Funktion (2.29) bildet die Bloch'sche Summe mit Schrauben-Funktionen.

Die Energieformel (2.11) bei dem Grenzübergang: Magnetfeld gegen Null, $n \to \infty$ und $n \cdot B$ konstant geht in die Bloch sche Energie über. Dasselbe gilt für die Eigenfunktion.
Der Beweis dafür ist leicht durchzuführen unter Verwendung der asymptotischen Entwicklungen der Lagnerschen Polynome[15].
Zur weiteren Erläuterung des Grenzüberganges kann folgendes zugefügt werden.
Die Energieformel (2.28) bzw. (2.11) wurde durch eine Störungsrechnung im Sinne des Bloch'schen Verfahrens abgeleitet. Die Bloch sche Summe wurde mit Schrauben-Funktionen gebildet.

Einen wesentlichen Beitrag zur Energie liefern nur die Schrauben-Funktionen, für welche sich die Vektoren $\vec{k}$ und $\vec{k}'$ um eine ganzes Vielfaches des reziproken Gittervektors unterscheiden:

$$\vec{k}' - \vec{k} = 2\pi \vec{\nu}_g \tag{2.30}$$

Für $\vec{k} = \frac{1}{c} \vec{A}(\vec{r}_m)$, wobei $\vec{r}_m$ das Zentrum der Schrauben-Funktion bedeutet, folgt

$$x_m - x_m' = \frac{4\pi}{Ba_2} g_2 , \quad y_m - y_m' = -\frac{4\pi}{Ba_1} g_1 \tag{2.31}$$

d.h. die Zentren der Schrauben-Funktionen unterscheiden sich um ein ganzes Vielfaches des reziproken Vektorpotentials $\frac{1}{c} \vec{A}(\vec{a}_j)$.

Im feldfreien Fall tritt ein Austauschintegral zwischen dem Atom j und dem am Ort m gelegenen Nachbaratom auf. Bei Anwesenheit des Feldes tritt ein Integral zwischen der Schrauben-Funktion, die das Zentrum im Atom j hat, und der Schrauben-Funktion mit dem Zentrum m auf. Verschwindet das Magnetfeld, so geht die Schrauben-Funktion in eine ebene Welle über, und das gerechnete Integral entspricht dann dem Wert eines Austauschintegrals.

III. Eigenwerte

1. Aussagen über die Eigenwerte der Energie

Die Energie bei Anwesenheit des Magnetfeldes ist eine periodische Funktion des Vektors $\vec{k}$ mit der Periode $\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{a}_j)$.
Ändert man den Vektor $\vec{k}$ um $\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{a}_j)$, ändert sich die Energie nicht.
Aus der Energieformel (2.11) folgt, daß die normalerweise diskreten Magnetniveaus, die freien Elektronen entsprechen, nicht gleichmäßigen Abstand haben und sich wegen der Gitterkräfte verbreitern.

Ferner gilt die Energieformel (2.11) für sämtliche Grenzübergänge. Geht das Magnetfeld gegen Null, $n \to \infty$ und bleibt n . H konstant, so liefert die Energieformel (2.11) gerade die Energie des Gitterelektrons, d.h. jedes Energieband (ohne Magnetfeld) spaltet bei Anwesenheit eines Magnetfeldes in einzelne schmale Bänder auf.

Für $V = 0$ erhalten wir aus (2.11) die Energie des freien Elektrons im Magnetfeld.

2. Diskussion der Energieformel

Die Energieformel (2.11) besteht aus zwei Teilen, der Energie des freien Elektrons und einem vom Vektor $\vec{\mathfrak{K}}$ abhängigen Bestandteil.

Beim zweiten Bestandteil tritt die dimensionslose Zahl $\frac{\pi^2}{2Ba^2}$ auf, und hat eine anschauliche Bedeutung, wie wir schon gesehen haben. Sie gibt das Verhältnis der Bandbreite des Energiebandes $1/2 \frac{\pi^2}{a^2}$ zu dem Abstand zweier Landau scher Niveaus B an.

Wir unterscheiden jetzt die zwei verschiedenen Fälle, nämlich

$$1/2 \frac{\pi^2}{a^2 B} \ll 1 \quad \text{und} \quad 1/2 \frac{\pi^2}{a^2 B} \gg 1.$$

Der erste Fall ist erfüllt für stärkere Magnetfelder oder wenn die Gitterkonstante a sehr groß ist.

Für $a^2B \to \infty$ folgt, daß die Energiezustände diskret und äquidistant sind. Der erste Fall erscheint uninteressant, da für alle wirklichen Felder $1/2 \frac{\pi^2}{a^2B} \gg 1$ ist.

Setzt man in die Gleichung (1.28) $E_o = 1/2 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$, so sieht man, daß die Zahl $1/2 \frac{\pi^2}{a^2B}$ gerade die Anzahl der Energiebänder im Magnetfeld ergibt, wobei das Energieband (ohne Magnetfeld) aufspaltet.

Die Breite dieser Bänder ist gegeben durch den folgenden Ausdruck

$$V(g_1, g_2)\, e^{-\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{a_1^2} + \frac{g_2^2}{a_2^2}\right)} L_n\left(\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{a_1^2} + \frac{g_2^2}{a_2^2}\right)\right) \qquad (3.1)$$

Bis auf den für die Bandbreite unwesentlichen Faktor

$$L_n\left(\frac{2\pi^2}{B}\left(\frac{g_1^2}{a_1^2} + \frac{g_2^2}{a_2^2}\right)\right)$$

(n endlich) ist die Breite bestimmt durch die Exponentialfunktion. In den betrachteten Fällen ist der Exponent dieser Funktion sehr groß, so daß man die Bandbreite sehr klein wird.

Die Breiten der neuen Bänder sind sehr schmal, und für kleine Feldstärken treten keine Bänder mehr auf.

3. Zusammenfassende Darstellung der Gitterelektronen im Magnetfeld

Wir bilden jetzt eine Einheitszelle im reziproken Gitter mit der Seitenlänge $\frac{\pi}{a}$ und können dann in dieser Zelle n Schrauben-Funktionen des freien Elektrons unterbringen, weil eine Schrauben-Funktion den Raum zwischen $-\sqrt{B}$ und $+\sqrt{B}$ einnimmt. Diese Schrauben-Funktionen hängen vom Magnetfeld ab, und es gibt für jede dieser Schrauben-Funktionen bei Einschaltung des Gitterpotentials ein Energieband. Wir sehen, daß das Energieband (ohne Magnetfeld) in so viele Bänder aufspaltet, wie die Zahl der auftretenden Schrauben-Funktionen angibt.

IV. Anwendungen auf den Diamagnetismus

1. Abzählung der Zustände: Normierung der Eigenfunktion

Für die Eigenfunktionen des Elektrons läßt sich die Forderung der Periodizität in der x- und y-Richtung nicht streng erfüllen. Da die Schrauben-Funktion im Unendlichen exponentiell verschwindet, muß sich das Elektron im wesentlichen in folgenden Intervallen bewegen:

$$\left| k_x + \frac{B}{2} y \right| \leq \sqrt{B} \quad ; \quad \left| k_y - \frac{B}{2} x \right| \leq \sqrt{B} \tag{4.1}$$

Wegen des exponentiellen Verschwindens kann man die Integrationen der Eigenfunktion über alle Werte von x, y durch Integrationen von $-\infty$ bis $+\infty$ ersetzen, wenn man das Grundintervall hinreichend groß wählt.

Als Elementarzelle wählen wir ein Parallelepiped mit den Kanten $(\frac{1}{\sqrt{B}}, \frac{1}{\sqrt{B}}, a_3)$, weil die Fläche $\frac{1}{B}$ gerade die Fläche in der (x, y)-Ebene ist, in der das Elektron im Magnetfeld sich bewegt. Um die Dichte der Eigenwerte im Impulsraum zu bestimmen, bei festgehaltenen n, ersetzen wir den unendlichen Raum durch ein endliches Grundparallelepiped mit den Lineardimensionen:

$$L_x = \frac{G_1}{\sqrt{B}} = \frac{G_1 a_1 a_2 \sqrt{B}}{a_1 a_2 \; B} = G_1' \, a_1 a_2 \sqrt{B} \; ; \qquad G_1 = a_1 a_2 B G_1'$$

$$L_y = \frac{G_2}{\sqrt{B}} = \frac{G_2 a_1 a_2 \sqrt{B}}{a_1 a_2 \; B} = G_2' \, a_1 a_2 \sqrt{B} \; ; \qquad G_2 = a_1 a_2 B G_2' \tag{4.2}$$

$$L_z = G_3 a_3$$

G_j bzw. G_j' sind große Zahlen.

Ferner ist die Energie im allgemeinen eine periodische Funktion von $\vec{k}$, und daher können wir die Werte von k_x und k_y auf folgende Intervalle beschränken.

$$-\frac{1}{2}B\alpha_2 \leq k_x \leq \frac{1}{2}B\alpha_2 , -\frac{1}{2}B\alpha_1 \leq k_y \leq \frac{1}{2}B\alpha_1 \tag{4.3}$$

Wir betrachten jetzt die Energieformel (2.21) und für den Fall, daß die Elektronen in der Z-Richtung frei sind, folgt

$$E_n(\vec{k}) = B(n+\frac{1}{2}) + \frac{1}{2}k_z^2 + 2Ve^{-\frac{1}{d^2}} L_n\left(\frac{1}{d^2}\right)\left(\cos\frac{4\pi k_x}{B\alpha} + \cos\frac{4\pi k_y}{B\alpha}\right) \tag{4.4}$$

Die Formel (4.4) ergibt sich durch (4.2) zu:

$$E_n(\vec{k}) = B(n+\frac{1}{2}) + \frac{1}{2}k_z^2 + 2Ve^{-\frac{1}{d^2}} L_n\left(\frac{1}{d^2}\right)\left(\cos\frac{2\pi q_x}{\sqrt{B}L_x} + \cos\frac{2\pi q_y}{\sqrt{B}L_y}\right) \tag{4.5}$$

Dabei ist geschrieben

$$q_x = 2G_1' k_x \alpha \quad , \quad q_y = 2G_2' k_y \alpha \tag{4.6}$$

Nun führen wir die Variablen (ξ, η)

$$\xi = \frac{2\pi q_x}{\sqrt{B}L_x} \quad , \quad \eta = \frac{2\pi q_y}{\sqrt{B}L_y} \tag{4.7}$$

ein; damit folgt das Volumenelement im „k"- Raum

$$d\tau = dq_x \cdot dq_y \, dk_z = \frac{B \cdot L}{(2\pi)^2} dk_z \cdot d\xi \cdot d\eta \tag{4.8}$$

mit $L = L_x \cdot L_y \cdot L_z$, also dem Volumen proportional.

Wenn wir das Magnetfeld gegen Null gehen lassen, erhalten wir aus (4.8) den Fall ohne Magnetfeld. Für freie Elektronen geht die Formel (4.8) in die Landau´sche über.

Die Eigenwertformel (4.5) lautet:

$$E_n(\xi,\eta,k_z) = B(n+\tfrac{1}{2}) + \tfrac{1}{2}k_z^2 + 2V e^{-\frac{1}{d^2}} L_n\left(\tfrac{1}{d^2}\right)(\cos\xi + \cos\eta) \cdot \quad (4.9)$$

und diese wird angewandt im Verlauf der weiteren Berechnung der Zustandssumme und der freien Energie.

Zur Normierung der Eigenfunktionen verlangen wir, daß $\int |\psi|^2 d\tau = 1$ ist, wenn das Integral über das Grundgebiet ersteckt wird.

Zur Durchführung der Normierung ist es zweckmäßig, die Eigenfunktion (2.2) in abgeänderter Form zu schreiben

$$\psi = \sqrt{\frac{2\pi a_3}{B\cdot L}} \sum_g \sum_\ell \frac{F_g^{\ell}(\vec{k})}{\sqrt{\ell!}} \psi_{\vec{k}+2\pi\vec{N}_g,\,\ell}\left(\vec{r} - \frac{4}{c\beta^2}\vec{A}(2\pi\vec{N}_g)\right) \cdot \quad (4.10)$$

wobei L das Volumen des Grundgebietes ist.

Dann lautet die Normierungsbedingung:

$$(\psi^*,\psi) = \frac{a_3}{B\cdot L} \sum_{g,g'} \sum_{\ell,\ell'=0}^{\infty} \frac{F_g^{\ell}(\vec{k})}{\sqrt{\ell!}} \cdot \frac{F_{g'}^{*\ell'}(\vec{k})}{\sqrt{\ell'!}} \cdot I_{\ell,\ell'}(g-g') = 1 \cdot \quad (4.11)$$

Dabei ist

$$I_{\ell,\ell'}(g-g') = \delta_{g_3,g_3'}(-1)^{\ell+\ell'} \sqrt{\frac{\ell!}{\ell'!}} \left[\sqrt{\frac{2}{B}}\left(\frac{g_2-g_2'}{\alpha_2} + i\,\frac{g_1-g_1'}{\alpha_1}\right)\right]^{\ell-\ell'} \cdot$$

$$\exp\left(-\frac{2\pi^2}{B}\left[\left(\frac{g_2-g_2'}{\alpha_2}\right)^2 + \left(\frac{g_1-g_1'}{\alpha_1}\right)^2\right]\right) \cdot L_{\ell'}^{\ell-\ell'}\left[\frac{2\pi^2}{B}\left[\left(\frac{g_2-g_2'}{\alpha_2}\right)^2 + \left(\frac{g_1-g_1'}{\alpha_1}\right)^2\right]\right] \quad (4.12)$$

Das Resultat (4.12) ist im wesentlichen von Null verschieden, wenn $g = g'$ und $l = l'$ ist, und zwar ist $I_{1,1}(o) = 1$.

Dann folgt aus (4.11)

$$\frac{a_3}{B} \sum_{g} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{F_g^{\ell}(\vec{k}) \cdot F_g^{*\ell}(\vec{k})}{\ell!} = L \tag{4.13}$$

a_3/B ist das Volumen einer Elementarzelle und jede Schrauben-Funktion (1.16) ist also pro Elementarzelle normiert. Daraus folgt wieder die anschauliche Darstellung aus Kapitel 3 § 3.

2. Berechnung der Zustandssumme Z

Für die Berechnung der diamagnetischen Suszeptibilität muß man die Zustandssumme Z kennen.

Die Zustandssumme Z ist definiert durch

$$Z = \sum_{j} e^{-\frac{E_j}{KT}} \tag{4.14}$$

worin über alle Werte der Energie mit der zugehörigen Vielfachheit zu summieren ist. K ist die Boltzmann-Konstante und T die absolute Temperatur. Wegen (4.8) und (4.9) erhalten wir für Z :

$$Z = \frac{BL}{(2\pi)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \iiint e^{-\frac{B}{KT}(n+\frac{1}{2}) - \frac{k_z^2}{2KT} - A(n)(\cos\xi + \cos\eta)} d\xi d\eta dk_z \tag{4.15}$$

Dabei ist

$$A(n) = \frac{2V e^{-\frac{1}{d^2}} L_n\left(\frac{1}{d^2}\right)}{KT}$$

Die Integrationsgrenzen sind für ξ, η von $-\pi$ bis $+\pi$ und für k_z von $-\infty$ bis $+\infty$

Nach Integration ergibt sich

$$Z = \sqrt{2\pi KT}\, \frac{B \cdot L}{(2\pi)^2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{B}{2KT}(2n+1)} I_0^2(A(n)) \tag{4.16}$$

Hierbei ist $I_o(x)$ die sogenannte modifizierte Bessel-Funktion nullter Ordnung.

Die Formel (4.16) für $V = 0$ geht in die Landau'sche über, weil $I_o(o)$ gleich 1 ist.

Für die Funktion $I_o^2(x)$ benutzen wir die Reihenentwicklung [15]

$$I_o^2(x) = \sum_{q} \left(\frac{x}{2}\right)^{2q} \frac{(q+1/2)}{q!\,3}$$

und brechen die Reihen nach dem quadratischen Glied ab, weil

$$A(n) \ll 1$$

ist, d.h. $q = 0, 1$ und aus (4.16) folgt

$$Z = Z_o + \frac{B \cdot L}{(2\pi)^2}\sqrt{2\pi KT}\left(\frac{V}{KT}\right)^2 e^{-\frac{2}{d^2} - \frac{B}{2KT}}$$

$$\cdot \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{Bn}{KT}} \left[L_n\left(\frac{1}{d^2}\right)\right]^2 \qquad (4.17)$$

Hierin bedeutet Z_o die Zustandssumme der freien Elektronen im Magnetfeld.

Aus der Theorie der Laguerre schen Polynome [18,19] läßt sich die Reihe über n summieren, damit erhalten wir die Zustandssumme

$$Z = Z_o\left\{1 + \left(\frac{V}{KT}\right)^2 \exp\left(-\frac{e^{\frac{B}{2KT}}}{d^2 \sinh\frac{B}{2KT}}\right) I_o\left(\frac{1}{d^2 \sinh\frac{B}{2KT}}\right)\right\} \qquad (4.18)$$

mit

$$Z_o = L \cdot \left(\frac{KT}{2\pi}\right)^{3/2} \cdot \frac{\frac{B}{2KT}}{\sinh\frac{B}{2KT}} \qquad (4.19)$$

---

18. E. Sondheimer, A. Wilson, Proc. Roy. Soc. A 210, 173 (1951)
19. A. Erdèlye, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi Higher Transcendental Functions, Vol. II McGraw-Hill (1953)

Die freie Energie F pro Volumeneinheit ist $-NKT \log Z$ und das magnetische Moment M pro Volumeneinheit $-\frac{\partial F}{\partial H}$; daraus folgt,

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = NKT \frac{\partial \log Z}{\partial H} = NKT \left\{ \frac{\partial \log Z_0}{\partial H} + \frac{\partial \log Z_1}{\partial H} \right\} \quad (4.20)$$

mit

$$Z_1 = 1 + \left(\frac{V}{KT}\right)^2 \exp\left(-\frac{e^{\frac{B}{2KT}}}{d^2 \sinh \frac{B}{2KT}}\right) \cdot I_0\left(\frac{1}{d^2 \sinh \frac{B}{2KT}}\right) \quad (4.21)$$

Aus (4.20) folgt $M = M_0 + M_1$

Dabei ist

$$M_0 = -\frac{N}{2c} \left(\coth \frac{B}{2KT} - \frac{2KT}{B}\right)$$

das magnetische Moment der freien Elektronen und

$$M_1 = \frac{N}{2c}\left(\frac{V}{KT}\right)^2 \exp\left(-\frac{e^{\frac{B}{2KT}}}{d^2 \sinh \frac{B}{2KT}}\right) \frac{1}{d^2 \sinh \frac{B}{2KT}} \cdot \frac{1}{Z_1} \cdot$$

$$\left\{ \left[\frac{2KT}{B} + \coth \frac{B}{2KT} - 1\right] e^{\frac{B}{2KT}} I_0\left(\frac{1}{d^2 \sinh \frac{B}{2KT}}\right) \right.$$

$$\left. - \left[\frac{2KT}{B} + \coth \frac{B}{2KT}\right] \cdot I_1\left(\frac{1}{d^2 \sinh \frac{B}{2KT}}\right) \right\}$$

Da das magnetische Moment bekannt ist, kann man aus der Formel $\chi = \frac{M}{H}$ die magnetische Suszeptibilität berechnen: also

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{M_0}{H} + \frac{M_1}{H} = \chi_0 + \chi_1 \quad (4.22)$$

Dabei ist χ_0 die Suszeptibilität der freien Elektronen und

$$\chi_1 = \frac{N}{2cH}\left(\frac{V}{KT}\right)^2 \exp\left(-\frac{e^{\frac{B}{2KT}}}{d^2 \sinh\frac{B}{2KT}}\right) \frac{1}{d^2 \sinh\frac{B}{2KT}} \frac{1}{Z_1}$$

$$\left[\left(\frac{2KT}{B} + \coth\frac{B}{2KT} - 1\right) e^{\frac{B}{2KT}} \cdot I_0\left(\frac{1}{d^2 \sinh\frac{B}{2KT}}\right)\right.$$

$$\left. - \left(\frac{2KT}{B} + \coth\frac{B}{2KT}\right) \cdot I_1\left(\frac{1}{d^2 \sinh\frac{B}{2KT}}\right)\right] . \qquad (4.23)$$

Die berechnete Suszeptibilität χ kann auch in folgender Form geschrieben werden

$$\bar{\chi} = \frac{KT}{N\mu^2}\chi = -\frac{1}{y}\left(\coth y - \frac{1}{y}\right) + \lambda\left(\frac{V}{KT}\right)^2 \frac{e^{-\frac{\lambda e^y}{y \sinh y}}}{y^2 \sinh y} \cdot$$

$$\cdot \frac{\left[\frac{1}{y} + \coth y - 1\right] e^y I_0\left(\frac{\lambda}{y \sinh y}\right) - \left[\frac{1}{y} + \coth y\right] \cdot I_1\left(\frac{\lambda}{y \sinh y}\right)}{1 + \left(\frac{V}{KT}\right)^2 \exp\left(-\lambda \frac{e^y}{y \sinh y}\right) I_0\left(\frac{\lambda}{y \sinh y}\right)} \qquad (4.24)$$

Dabei ist gesetzt

$$y = \frac{\mu H}{KT} = \frac{B}{2KT} = \frac{H}{2cKT} \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{2E_0}{KT} = \frac{\pi^2}{KT\alpha^2}$$

in atomaren Einheiten. (In gewöhnlichen Einheiten ist $\mu = \frac{e\hbar}{2mc}$ das Bohrsche Magneton und $\lambda = \frac{2E_0}{KT} = \frac{\hbar^2\pi^2}{KTm\alpha^2}$

Um die Diskussion der Formel (4.24) zu erleichtern, wird $V = 2E_0$ gesetzt, so daß $\frac{V}{KT} = \frac{2E_0}{KT} = \lambda$ gilt.

Dann wird

$$-\bar{\chi} = \frac{1}{y}\left(\coth y - \frac{1}{y}\right) - \lambda^3 \frac{e^{-\frac{\lambda e^{y}}{y \sinh y}}}{y^2 \sinh y} \cdot$$

$$\cdot \frac{\left(\frac{1}{y} + \coth y - 1\right) e^{y} I_0\left(\frac{\lambda}{y \sinh y}\right) - \left(\frac{1}{y} + \coth y\right) I_1\left(\frac{\lambda}{y \sinh y}\right)}{1 + \lambda^2 \exp\left(-\lambda \frac{e^{y}}{y \sinh y}\right) I_0\left(\frac{\lambda}{y \sinh y}\right)} \tag{4.25}$$

Die Ergebnisse der numerischen Auswertung von (4.25) sind in Abb. 1 für verschiedene Parameter-Werte λ aufgetragen. Abb. 1 zeigt die Abweichung der Suszeptibilität der freien Elektronen im Magnetfeld durch den Einfluß des Gitterpotentials.

3. <u>Berechnung der freien Energie F</u>

Die freie Energie ist gegeben* durch

$$F - N\zeta = 2 \int Z(E) \frac{\partial f_0(E)}{\partial E} dE \tag{4.26}$$

Dabei ist $f_0(E) = \dfrac{1}{e^{\frac{E-\zeta}{kT}} + 1}$ die Fermi-Funktion, ζ die Fermi-Energie

und

$$Z(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{ES} \frac{Z(S)}{S^2} ds \tag{4.27}$$

wobei $Z(E)$ die Zustandsdichte bedeutet und c dieselbe Bedeutung hat, wie bei Wilson.

Für die Zustandssumme (4.17) ergibt sich

$$F = F_0 + \frac{B V^2}{\sqrt{2}\,\pi^2} e^{-\frac{2}{d^2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[L_n\left(\frac{1}{d^2}\right)\right]^2 \cdot \int_c^{\infty} \left[E - B\left(n + \tfrac{1}{2}\right)\right]^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial f_0(E)}{\partial E} dE \tag{4.28}$$

*A Wilson. Theorz of Metals (2nd ed) Cam. Un. Press (1953) Seite 164, (6.64.6)

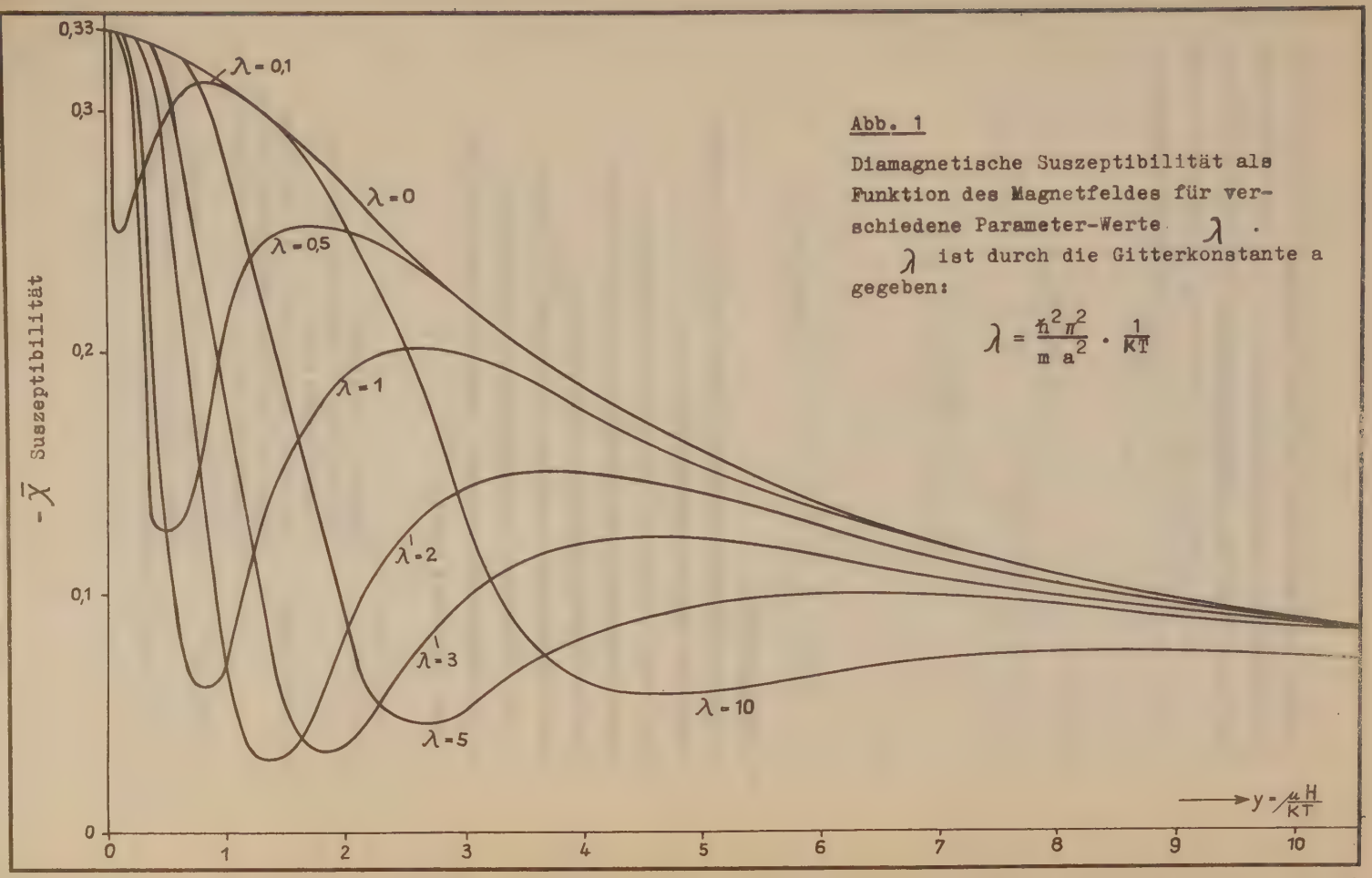

Abb. 1

Diamagnetische Suszeptibilität als Funktion des Magnetfeldes für verschiedene Parameter-Werte λ.

λ ist durch die Gitterkonstante a gegeben:

$$\lambda = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m\, a^2} \cdot \frac{1}{KT}$$

2.VIII.62

wobei F_0 die freie Energie der freien Elektronen pro Volumeneinheit im Magnetfeld bedeutet.

Die Formel (4.28) führt nach Integration zu

$$F = F_0 + \frac{BV^2}{\sqrt{2}\,\pi^2} e^{-\frac{2}{d^2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[L_n\left(\frac{1}{d^2}\right)\right]^2 S_n \qquad (4.29)$$

Dabei ist

$$S_n = \sqrt{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{|l|}{KT}}\, e^{-(l+1)\frac{B(n+\frac{1}{2})-\zeta}{KT}} \qquad (4.30)$$

$$\left\{ 1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{B}{KT}(l+1)(n+\tfrac{1}{2})} \right) \right\}$$

und

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$ das Fehlerintegral.

4. Diamagnetismus

Da die freie Energie bekannt ist, können wir das magnetische Moment und die Suszeptibilität berechnen.

Die Formel (4.29) zeigt, daß zu der freien Energie der freien Elektronen im Magnetfeld noch ein additiver Betrag durch die Festkörper-Elektronen hinzukommt.

Für die Berechnung des de Haas- van Alphen[20, 21]-Effekts ist es erforderlich, die Singularitäten und die Residuen der Zustandssumme zu kennen, welche als Funktion der komplexen Variablen s auftreten[22, 23].

---

20. R. Peierls, Z. Physik 81, 186 (1933) Quantum Theory of solids (Oxford at the Clarendon Press 1955)
21. D. Schoenberg, Proc. Roz. Soc. London A, 170, 341 (1939) Physica 19, 791 (1953). Progress in Low Temperature Physics, ed. C. T. Gorter (New York) 2 Chap. 8.
22. A. Wilson, Proc. Cambr. phil. Soc. 49, 292 (1953), The Theory of Metals (2nd ed.) Cam. Un. Press (1953)
23. J. Hebborn, E. Sondheimer, J. Phzs. Chem. Solids 13, 105 (1960)

Ferner zeigt die Formel (4.18), daß die Singularitäten genau an den Stellen $s = \pm im$, $m = 1, 2, 3, \ldots$ der freien Elektronen auftreten und unabhängig von der Festkörper-Bindung sind. Die Residuen ihrerseits hängen von der Festkörper-Bindung ab.

Zusammenfassung

Es wurde die Schrödinger-Gleichung für den Fall eines periodischen Gitterpotentials im äußeren homogenen Magnetfeld näherungsweise gelöst.

Für konstantes Potential ist das Vektorpotential (1.3) benutzt und als Eigenfunktion ist eine Schrauben-Funktion[12] angewandt.

In Anwesenheit des Gitterpotentials ist eine geeignete Eigenfunktion gefunden, welche die Harper'sche Symmetrie-Bedingung erfüllt und die Gestalt der formalen Harper'schen Lösung hat. In diesem Fall (abgesehen von der Bewegung in der Feld-Richtung) ergibt sich eine gestörte Energie, die von den Quantenzahlen $\vec{k}$ und n abhängt.

Die positive ganze Zahl n nummeriert jetzt eine neue Art von Energiebändern, denn die Energiezustände des freien Elektrons im Magnetfeld verbreitern sich wegen der Gitterkräfte in kleine Bänder.

Im allgemeinen ist der Niveauabstand nicht mehr gleichmäßig. Da die kleinen Bänder sehr schmal sind, ist die Veränderung des Bandabstandes klein und das Energiespektrum behält seinen diskreten Charakter.

Ferner ist die Energie eine periodische Funktion von $\vec{k}$ mit der Periode $1/c \cdot \vec{A}(\vec{a}_j)$. Wegen der Periodizität werden die Zahlen k_x, k_y auf die nachstehended Intervalle beschränkt:

$$-\frac{1}{2}Ba_2 \leq k_x \leq \frac{1}{2}Ba_2 \quad , \quad -\frac{1}{2}Ba_1 \leq k_y \leq \frac{1}{2}Ba_1$$

Die gerechnete Energieformel geht bei dem Grenzübergang: Magnetfeld gegen Null, $n \to \infty$ und $n \cdot H$ konstant in die Bloch'sche Energie über. Dieser Grenzübergang stimmt genau mit der anschaulichen Darstellung von Kapitel 3 § 3 überein. Nämlich jedes Energieband (ohne Magnetfeld) spaltet in so viele neue Bänder auf, wie die Zahl der auftretended Schrauben-Funktionen angibt, die innerhalb einer ebenen

Einheitszelle im reziproken Gitterraum liegen. Für Magnetfeld Null wird die Zahl der Schrauben-Funktionen unendlich groß.

Eine besser geeignete Störungsrechnung nach Bildung der Bloch'schen Summe mit den ungestörten Eigenfunktionen (Schrauben-Funktionen) hat dieselben Resultate ergeben.

Die Ergebnisse wurden auf den Diamagnetismus angewendet und der Einfluß des Gitters auf die diamagnetische Suszeptibilität untersucht.

Anhang 1

Ableitung der Eigenfunktion (2.2) aus dem Harper'schen Formalismus

Für die Bestimmung der Eigenwerte E hat Harper folgende Gleichung gegeben: (Harper, Seite 883, Gleichung (2.5))

$$\frac{1}{2}\left[\vec{K}+\vec{K}_g-\frac{1}{c}\vec{A}(i\nabla_K)\right]^2 U_g(\vec{K})+\sum_{g',g''} V(g')\,U_{g''}(\vec{K})=E\,U_g(\vec{K}) \tag{1}$$

wobei V_g die Fourier-Komponenten der $V(\vec{r})$ sind und $\vec{K}_g=\vec{K}_{g'}+\vec{K}_{g''}$ der reziproke Gittervektor ist.
Die Gleichung (1) ist ein System von unendlich vielen Differentialgleichungen zweiter Ordnung.
Für das Vektorpotential (1.3) ergibt sich aus der Gleichung (1):

$$\left\{\left[K_x+\frac{2\pi}{a_1}g_1+i\frac{B}{2}\frac{\partial}{\partial K_y}\right]^2+\left[K_y+\frac{2\pi}{a_2}g_2-i\frac{B}{2}\frac{\partial}{\partial K_x}\right]^2 + \left(K_z+\frac{2\pi}{a_3}g_3\right)^2\right\}U_g(\vec{K})+2\sum_{g'}V(g')\,U_{g-g'}(\vec{K})=2E\,U_g(\vec{K}) \tag{2}$$

oder

$$\left\{\frac{B^2}{4}\left(\frac{\partial^2}{\partial K_x^2}+\frac{\partial^2}{\partial K_y^2}\right)+iB\left(K_y+\frac{2\pi}{a_2}g_2\right)\frac{\partial}{\partial K_x}-iB\left(K_x+\frac{2\pi}{a_1}g_1\right)\frac{\partial}{\partial K_y}\right\}U_g(\vec{K})$$

$$+\left[2E-K_x^2-K_y^2-4\pi\left(\frac{g_1}{a_1}K_x+\frac{g_2}{a_2}K_y\right)-4\pi^2\left(\frac{g_1^2}{a_1^2}+\frac{g_2^2}{a_2^2}\right)-\left(K_z+\frac{2\pi}{a_3}g_3\right)^2\right]\cdot U_g(\vec{K}) \tag{3}$$

$$=2\sum_{g'}V(g')\,U_{g-g'}(\vec{K}).$$

Setzt man zur Integration an:

$$U_g(\vec{K}) = e^{-\frac{1}{B}(K_x^2+K_y^2)} \cdot \varphi_g(\vec{K}) \tag{4}$$

so erhält man für $\varphi_g(\vec{K})$ die Gleichung

$$\left\{\frac{B^2}{4}\left(\frac{\partial^2}{\partial K_x^2}+\frac{\partial^2}{\partial K_y^2}\right)-B(K_y+iK_x)\left(\frac{\partial}{\partial K_y}-i\frac{\partial}{\partial K_x}\right)-2\pi i B\left(\frac{g_1}{\alpha_1}\frac{\partial}{\partial K_y}-i\frac{g_2}{\alpha_2}\frac{\partial}{\partial K_x}\right)\right.$$

$$\left.+\left[2E-B-4\pi\left(\frac{g_2}{\alpha_2}-i\frac{g_1}{\alpha_1}\right)(K_y+iK_x)-4\pi^2\left(\frac{g_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{g_2^2}{\alpha_2^2}\right)-\left(k_z+\frac{2\pi}{\alpha_3}g_3\right)^2\right]\right\}\varphi_g(\vec{K}) \tag{5}$$

$$=2\sum_{g'} V(g')\,\varphi_{g-g'}(\vec{K})$$

Für die Gleichung (5) machen wir den Ansatz:

$$\varphi_g(\vec{K}) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{(-1)^\ell}{\ell!}\left(\frac{2}{B}\right)^{\frac{\ell}{2}}(K_y+iK_x)^\ell\, e^{-\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1}{\alpha_1}K_y-\frac{g_2}{\alpha_2}K_x\right)}\cdot F_g^\ell(\vec{k}) \tag{6}$$

dann erhalten wir für die Koeffizienten $F_g^1(\vec{k})$

$$\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{(-1)^\ell}{\ell!}\left(\frac{2}{B}\right)^{\frac{\ell}{2}}(K_y+iK_x)^\ell\, e^{-\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1}{\alpha_1}K_y-\frac{g_2}{\alpha_2}K_x\right)}$$

$$\cdot\left\{2\pi\sqrt{2B}\left[\left(\frac{g_2}{\alpha_2}+i\frac{g_1}{\alpha_1}\right)F_g^{\ell+1}+\ell\left(\frac{g_2}{\alpha_2}-i\frac{g_1}{\alpha_1}\right)F_g^{\ell-1}\right.\right. \tag{7}$$

$$\left.+\left[2E-B(2\ell+1)-4\pi^2\left(\frac{g_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{g_2^2}{\alpha_2^2}\right)-\left(k_z+\frac{2\pi}{\alpha_3}g_3\right)^2\right]F_g^{\ell}\right.$$

$$\left.-2\sum_{g'}V(g')F_{g-g'}^{\ell}\exp\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1'}{\alpha_1}K_y-\frac{g_2'}{\alpha_2}K_x\right)\right\}=0$$

daraus folgt

$$2\pi\sqrt{2B}\Big[\Big(\frac{g_2}{\alpha_2}+i\frac{g_1}{\alpha_1}\Big)F_g^{\ell+1}+\ell\Big(\frac{g_2}{\alpha_2}-i\frac{g_1}{\alpha_1}\Big)F_g^{\ell-1}$$

$$\Big[2E-B(2\ell+1)-4\pi^2\Big(\frac{g_1^2}{\alpha_1^2}+\frac{g_2^2}{\alpha_2^2}\Big)-\Big(k_z+\frac{2\pi}{\alpha_3}g_3\Big)^2\Big]F_g^{\ell} \tag{8}$$

$$=2\sum_{g'}V(g')F_{g-g'}^{\ell}\exp\frac{4\pi i}{B}\Big(\frac{g_1'}{\alpha_1}k_y-\frac{g_2'}{\alpha_2}k_x\Big)$$

genau die Gleichung (2.6).

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung lautet jetzt nach Harper:

$$\psi\sim\sum_g\sum_{\ell=0}^{\infty}\Big(\frac{2}{B}\Big)^{\frac{\ell}{2}}\frac{F_g^{\ell}(\vec{k})}{\ell!}(-K_y-iK_x)^{\ell}$$

$$e^{-\frac{1}{B}(K_x^2+K_y^2)+i(\vec{K}+2\pi\vec{\tilde{N}}_g)\cdot\vec{r}-\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1}{\alpha_1}k_y-\frac{g_2}{\alpha_2}k_x\right)} \tag{9}$$

oder

$$\psi=\sqrt{\frac{2\pi}{B}}\sum_g\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{F_g^{\ell}(\vec{k})}{\sqrt{\ell!}}e^{-\frac{4\pi i}{B}\left(\frac{g_1}{\alpha_1}k_y-\frac{g_2}{\alpha_2}k_x\right)+2\pi i(\vec{r},\vec{\tilde{N}}_g)}\cdot\psi_{\vec{k},\ell}(\vec{r})$$

$$=\sqrt{\frac{2\pi}{B}}\sum_g\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{F_g^{\ell}(\vec{k})}{\sqrt{\ell!}}\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{\tilde{N}}_g;\ell}\Big(\vec{r}-\frac{4}{cB^2}\vec{A}(2\pi\vec{\tilde{N}}_g)\Big) \tag{10}$$

wobei $\psi_{\vec{k},\ell}(\vec{r})$ die Schrauben-Funktion (1.16) bedeutet. Die Eigenfunktion (10) ist identisch mit (2.2).

Lebenslauf

Ich bin geboren am 2 . 8 . 1928 in Avdella-Kozani (Griechenland) als Sohn des Gutsbesitzers Demetre Jannussis und seiner Frau Glykeria, geb. Karayannis .

Nach dem Besuch der Grundschule in Tirnavos und das Gymnasium in Larissa wurde ich 1948 an der Universität Athen imatrikuliert und studierte Mathematik .

Am 1 . 3 . 1954 bestand ich das Diplomexamen für Mathematiker .

Zum W . S 1954 wurde ich in Frankfurt/Main imatrikuliert um Physik bei den Professoren Hund und Mrowka zu studieren .

1959 bestand ich dort das Diplomexamen für Physiker . Danach arbeitete ich bei der Firma A . E . G Frankfurt/Main Abteilung Kernenergie-anlagen als Diplomphysiker.

Während dieser Zeit arbeitete ich auch an meiner Dissertation .